数理解析研究所講究録
130巻 1971年 133-141

Orthorhombic Lattice Green's Functions

東北大,工　　　　山崎義武

(序)　我々は次の Lattice Green's Function (LGF)

$$G(t;\{\gamma_1\},\{\gamma_{12}\},\{\gamma_{123}\};l,m,n)=\frac{1}{\pi^3}\int_0^\pi dx\int_0^\pi dy\int_0^\pi dz\,\cos lx\cos my\cos nz/(t-\omega) \qquad (1)$$

を考える。こゝに,

$$\omega\equiv\gamma_1\cos x+\gamma_2\cos y+\gamma_3\cos z+\gamma_{12}\cos x\cos y+\gamma_{23}\cos y\cos z+\gamma_{31}\cos z\cos x+\gamma_{123}\cos x\cos y\cos z \qquad (2)$$

t; energy, (l,m,n); reference lattice point (RLP) を表わす整数の set

$\{\gamma\}$ の set は

<u>3次元</u> で

	$\{\gamma_1\}\equiv(\gamma_1,\gamma_2,\gamma_3)$	$\{\gamma_{12}\}\equiv(\gamma_{12},\gamma_{23},\gamma_{31})$	$\{\gamma_{123}\}\equiv(\gamma_{123})$
単独;	SO の 1st n.n. int. or 重心系の momentum	FCO の 1st n.n. int.	BCO の 1st n.n. int.
単独でない;	SO の 1st n.n. int.	SO の 2nd n.n. int.	SO の 3rd n.n. int.

(註)
SO: Simple Orthorhombic Lattice, FCO; Face Centered Orthorhombic Lattice, BCO; Body Centered Orthorhombic Lattice, R; Rectangular Lattice, CR; Centered R.

2次元で

$\{\gamma_1\} \equiv (\gamma_2, \gamma_3)$ $\{\gamma_{12}\} \equiv (\gamma_{23})$ $\{\gamma_{123}\} \equiv (0)$

単独；R の 1st n.n. int. or 重心系の momentum CR の 1st n.n. int.

単独でない；R の 1st n.n. int. R の 2nd n.n. int.

を表わす parameters である。

既に、SO で 1st n.n. int. のみをもつ系の原点での LGF は[1]で、又、任意の RLP での LGF は[2]にまとめられている。FCO で 1st n.n. int. のみをもつ系の原点[3]を含めた任意の RLP[4]での LGF がまとめられ、SO で 2nd n.n. と 3rd n.n. int まで含めた系の任意の RLP での LGF は[5][6]にまとめられている。この中には special case として BCO で 1st n.n. int. のみをもつ系の LGF が含まれている。

こゝで用いられた方法は、energy を complex number に考えると LGF は 2次元と3次元格子で、それぞれ、complex modulus k をもつ完全楕円積分とそれ自身を含む1重の積分で表わすことが出来、complex k plane でのそれらの解析性により LGF の real と imaginary part が得られる。原点[1][3][5]での LGF は第1種のみで、それを除く RLP では第1,2,3種の完全楕円積分と簡単な定積分により求められている。1), 3) は $k>1$, $k<-1$, $-1<k<1$, $k_I>0$, $k_I<0$ ($k=ik_I$, k_I; real) の場合に属する3次元積分の最後の積分変数 x と energy の関係を analytic に求めてから数値計

算を行っているのに対し，4)，5)，6)は相互作用を表わすparametersが多く対応するxとenergyの関係が複雑化しすぎるためその過程も数値計算させている。

個々の場合に対する詳細なformulationと数値結果については対応する文献にゆずって，以下では(1)，(2)式で表わされるRLPでのLGFを求める方法を概観するにとどめる。[4)5)6)]

（本論）　(1)式を変数zとyについて積分すると変数xを含む項がparameterとして残っているので

$$G_2(\tilde{t};\tilde{\gamma}_{12},\tilde{\gamma}_{23},\tilde{\gamma}_{31};m,n)=\frac{1}{\pi^2}\int_0^{\pi}dy\int_0^{\pi}dz\,\cos my\cos nz\Big/\left(\tilde{t}-\tilde{\gamma}_{12}\cos y-\tilde{\gamma}_{23}\cos y\cos z-\tilde{\gamma}_{31}\cos z\right) \tag{3}$$

を導入する。こゝに，

$$G(t;\{\gamma_1\},\{\gamma_{12}\},\{\gamma_{123}\};l,m,n)=\frac{1}{\pi}\int_0^{\pi}dx\,\cos lx\,G_2(\tilde{t};\tilde{\gamma}_{12},\tilde{\gamma}_{23},\tilde{\gamma}_{31};m,n) \tag{1'}$$

$$\begin{aligned}&\tilde{t}\equiv t-\gamma_1\cos x\equiv\hat{s}-i\epsilon\quad(\epsilon\geq 0),\qquad t\equiv s-i\epsilon\\&\tilde{\gamma}_{12}\equiv\gamma_{12}\cos x+\gamma_2,\qquad\tilde{\gamma}_{23}\equiv\gamma_{23},\qquad\tilde{\gamma}_{31}\equiv\gamma_{31}\cos x+\gamma_3.\end{aligned} \tag{4}$$

(3)式はHelmholtz方程式のGreen's Function

$$\begin{aligned}&2\tilde{t}G_2(\tilde{t};m,n)-\tilde{\gamma}_{12}\{G_2(\tilde{t};m+1,n)+G_2(\tilde{t};m-1,n)\}\\&-\frac{\tilde{\gamma}_{23}}{2}\{G_2(\tilde{t};m+1,n+1)+G_2(\tilde{t};m+1,n-1)+G_2(\tilde{t};m-1,n+1)+G_2(\tilde{t};m-1,n-1)\}\\&-\tilde{\gamma}_{31}\{G_2(\tilde{t};m,n+1)+G_2(\tilde{t};m,n-1)\}=2\delta_{m,0}\delta_{n,0}\end{aligned} \tag{5}$$

で定義され，次の対称性

$$G_2(-m)=G_2(m),\quad G_2(\tilde{t};-\tilde{\gamma}_{12})=-(-1)^m G_2(-\tilde{t};\tilde{\gamma}_{12})^*,\quad G_2(\tilde{t};-\tilde{\gamma}_{31})=-(-1)^m G_2(-\tilde{t};\tilde{\gamma}_{31})^*,$$

$$G_2(\tilde{t};-\tilde{\gamma}_{23})=-(-1)^{m+n}G_2(-\tilde{t};\tilde{\gamma}_{23})^*,\qquad G_2(-\tilde{\gamma}_{12};-\tilde{\gamma}_{31})=(-1)^{m+n}G_2(\tilde{\gamma}_{12};\tilde{\gamma}_{31}),$$

$$G_2(-\tilde{\gamma}_{12};-\tilde{\gamma}_{23})=(-1)^m G_2(\tilde{\gamma}_{12};\tilde{\gamma}_{23}), \qquad G_2(-\tilde{\gamma}_{23};-\tilde{\gamma}_{31})=(-1)^n G_2(\tilde{\gamma}_{23};\tilde{\gamma}_{31}),$$

$$G_2(\tilde{t};-\tilde{\gamma}_{12},-\tilde{\gamma}_{23},-\tilde{\gamma}_{31})=-G_2(-\tilde{t};\tilde{\gamma}_{12},\tilde{\gamma}_{23},\tilde{\gamma}_{31})^* \tag{6}$$

をみたすので

$$m\geq 0,\ n\geq 0,\ \tilde{\gamma}_{12}\geq 0,\ \tilde{\gamma}_{23}\geq 0,\ \tilde{\gamma}_{31}\geq 0 \tag{7}$$

の場合を考える。

$n=0$ のとき(3)式は

$$G_2(\tilde{t};m+2,0)=\frac{1}{\tilde{\gamma}_{12}^2-\tilde{\gamma}_{23}^2}\Big\{2(\tilde{t}\tilde{\gamma}_{23}+\tilde{\gamma}_{31}\tilde{\gamma}_{12})\Big[\frac{2m+1}{m+1}G_2(\tilde{t};m+1,0)+\frac{2m-1}{m+1}G_2(\tilde{t};m-1,0)\Big]$$
$$-\frac{2m}{m+1}(2\tilde{t}^2-2\tilde{\gamma}_{31}^2+\tilde{\gamma}_{12}^2-\tilde{\gamma}_{23}^2)G_2(\tilde{t};m,0)-\frac{m-1}{m+1}G_2(\tilde{t};m-2,0)\Big\} \tag{8}$$

の recurrence formula をみたす。$G_2(\tilde{t};0,0)$, $G_2(\tilde{t};1,0)$, $G_2(\tilde{t};2,0)$ の3つのLGFが分ればγ軸上のすべてのLGFが得られる。

$$\tilde{\gamma}_{12}\geq\tilde{\gamma}_{23} \quad \text{or} \quad \tilde{\gamma}_{23}>\tilde{\gamma}_{12} \quad \text{for} \quad \tilde{t}>\tilde{\gamma}_{12}+\tilde{\gamma}_{23}+\tilde{\gamma}_{31} \tag{9}$$

のとき

$$G_2(\tilde{t};0,0)=\frac{4}{\pi\sqrt{(\tilde{t}+\tilde{\gamma}_{23})^2-(\tilde{\gamma}_{12}-\tilde{\gamma}_{31})^2}}K(k)$$
$$G_2(\tilde{t};1,0)=\frac{4}{\pi\sqrt{(\tilde{t}+\tilde{\gamma}_{23})^2-(\tilde{\gamma}_{12}-\tilde{\gamma}_{31})^2}}\Big[\frac{\tilde{t}+\tilde{\gamma}_{31}}{\tilde{\gamma}_{12}-\tilde{\gamma}_{23}}K(k)-\frac{\tilde{t}-\tilde{\gamma}_{12}+\tilde{\gamma}_{23}+\tilde{\gamma}_{31}}{\tilde{\gamma}_{12}-\tilde{\gamma}_{23}}\Pi(\alpha^2,k)\Big]$$
$$G_2(\tilde{t};2,0)=\frac{2}{\pi\sqrt{(\tilde{t}+\tilde{\gamma}_{23})^2-(\tilde{\gamma}_{12}-\tilde{\gamma}_{31})^2}}\frac{1}{(\tilde{\gamma}_{23}-\tilde{\gamma}_{12})^2}\Big[\Big\{2(\tilde{t}+\tilde{\gamma}_{31})^2+\frac{(\tilde{t}-\tilde{\gamma}_{12}+\tilde{\gamma}_{23}+\tilde{\gamma}_{31})^2}{\alpha^2-1}\Big\}K(k)$$
$$-\frac{(\tilde{t}-\tilde{\gamma}_{12}+\tilde{\gamma}_{23}+\tilde{\gamma}_{31})^2}{(\alpha^2-1)(1-\frac{k^2}{\alpha^2})}E(k)-(\tilde{t}-\tilde{\gamma}_{12}+\tilde{\gamma}_{23}+\tilde{\gamma}_{31})\Big\{2(\tilde{t}+\tilde{\gamma}_{31})-\frac{\alpha^4-(1+k^2)\alpha^2+3k^2}{(\alpha^2-1)(\alpha^2-k^2)}\Big\}\Pi(\alpha^2,k)\Big] \tag{10}$$

ここに,

$$k=2\sqrt{\frac{\tilde{\gamma}_{23}\tilde{t}+\tilde{\gamma}_{12}\tilde{\gamma}_{31}}{(\tilde{t}+\tilde{\gamma}_{23})^2-(\tilde{\gamma}_{12}-\tilde{\gamma}_{31})^2}}, \qquad \alpha^2=\frac{2(\tilde{\gamma}_{12}-\tilde{\gamma}_{23})}{\tilde{t}+\tilde{\gamma}_{12}-\tilde{\gamma}_{23}+\tilde{\gamma}_{31}}. \tag{11}$$

条件(9)がみたされないときは complex number $\tilde{t}$ から, complex modulus k に対する $K(k)$, $E(k)$, $\Pi(\alpha^2;k)$ [Appendix参照] を用いて

(10) 式の LGF が計算出来る。

$\tilde{\gamma}_{12}$ と $\tilde{\gamma}_{31}$ の対称性から $\tilde{\gamma}_{12} \leq \tilde{\gamma}_{31}$ の場合を考える。このとき次の 5 つの場合

[[$-1 < k < 1$]]

- $\tilde{\gamma}_{23} + (\tilde{\gamma}_{31} + \tilde{\gamma}_{12}) < \tilde{s} < \infty$
- $\tilde{\gamma}_{31} < \tilde{\gamma}_{23}$ and $\begin{cases} -\tilde{\gamma}_{23} - (\tilde{\gamma}_{31} - \tilde{\gamma}_{12}) < \tilde{s} < -\tilde{\gamma}_{23} + (\tilde{\gamma}_{31} - \tilde{\gamma}_{12}) \\ -\dfrac{\tilde{\gamma}_{31}\tilde{\gamma}_{12}}{\tilde{\gamma}_{23}} < \tilde{s} < \tilde{\gamma}_{23} - (\tilde{\gamma}_{31} + \tilde{\gamma}_{12}) \end{cases}$
- $\tilde{\gamma}_{12} < \tilde{\gamma}_{23} < \tilde{\gamma}_{31}$ and $-\tilde{\gamma}_{23} - (\tilde{\gamma}_{31} - \tilde{\gamma}_{12}) < \tilde{s} < \tilde{\gamma}_{23} - (\tilde{\gamma}_{31} + \tilde{\gamma}_{12})$
- $0 < \tilde{\gamma}_{23} < \tilde{\gamma}_{12}$ and $-\dfrac{\tilde{\gamma}_{31}\tilde{\gamma}_{12}}{\tilde{\gamma}_{23}} < \tilde{s} < \tilde{\gamma}_{23} - (\tilde{\gamma}_{31} + \tilde{\gamma}_{12})$

[[$1 < k$]]

- $\tilde{\gamma}_{31} < \tilde{\gamma}_{23}$ and $\tilde{\gamma}_{23} - (\tilde{\gamma}_{31} + \tilde{\gamma}_{12}) < \tilde{s} < \tilde{\gamma}_{23} + (\tilde{\gamma}_{31} + \tilde{\gamma}_{12})$
- $0 < \tilde{\gamma}_{23} < \tilde{\gamma}_{31}$ and $-\tilde{\gamma}_{23} + (\tilde{\gamma}_{31} - \tilde{\gamma}_{12}) < \tilde{s} < \tilde{\gamma}_{23} + (\tilde{\gamma}_{31} + \tilde{\gamma}_{12})$

[[$k < -1$]]

- $\tilde{\gamma}_{12} < \tilde{\gamma}_{23} < \tilde{\gamma}_{31}$ and $\tilde{\gamma}_{23} - (\tilde{\gamma}_{31} + \tilde{\gamma}_{12}) < \tilde{s} < -\dfrac{\tilde{\gamma}_{31}\tilde{\gamma}_{12}}{\tilde{\gamma}_{23}}$
- $0 < \tilde{\gamma}_{23} < \tilde{\gamma}_{12}$ and $\tilde{\gamma}_{23} - (\tilde{\gamma}_{31} + \tilde{\gamma}_{12}) < \tilde{s} < -\tilde{\gamma}_{23} - (\tilde{\gamma}_{31} - \tilde{\gamma}_{12})$

[[$0 < k_I$]]

- $\tilde{\gamma}_{31} < \tilde{\gamma}_{23}$ and $-\tilde{\gamma}_{23} + (\tilde{\gamma}_{31} - \tilde{\gamma}_{12}) < \tilde{s} < -\dfrac{\tilde{\gamma}_{31}\tilde{\gamma}_{12}}{\tilde{\gamma}_{23}}$
- $\tilde{\gamma}_{12} < \tilde{\gamma}_{23} < \tilde{\gamma}_{31}$ and $-\dfrac{\tilde{\gamma}_{31}\tilde{\gamma}_{12}}{\tilde{\gamma}_{23}} < \tilde{s} < -\tilde{\gamma}_{23} + (\tilde{\gamma}_{31} - \tilde{\gamma}_{12})$
- $0 < \tilde{\gamma}_{23} < \tilde{\gamma}_{12}$ and $-\tilde{\gamma}_{23} - (\tilde{\gamma}_{31} - \tilde{\gamma}_{12}) < \tilde{s} < -\tilde{\gamma}_{23} + (\tilde{\gamma}_{31} - \tilde{\gamma}_{12})$

[[$k_I < 0$]]

- $\tilde{\gamma}_{12} < \tilde{\gamma}_{23}$ and $-\infty < \tilde{s} < -\tilde{\gamma}_{23} - (\tilde{\gamma}_{31} - \tilde{\gamma}_{12})$

- $0 < \tilde{\gamma}_{23} < \tilde{\gamma}_{12}$ and $-\infty < \tilde{s} < -\dfrac{\tilde{\gamma}_{31}\tilde{\gamma}_{12}}{\tilde{\gamma}_{23}}$ (12)

に分け、対応する解析接続された $K(k)$, $E(k)$, $\Pi(\alpha^2;k)$ の式を用いて(10)式の計算を行う。

2次元格子の場合には(10)と(8)式から y 軸上の、3次元格子の場合には(10),(8)と(11)式から x-y 面上の、任意の RLP での LGF が得られる。

これらの LGF が分ると2次元格子の場合には最近接の y 軸に平行な線上の、又、3次元格子の場合には最近接の x-y 面に平行な面上の、任意の RLP での LGF が、それぞれ、

$$\tilde{\gamma}_{23}\{G_2(\tilde{t};m+1,1)+G_2(\tilde{t};m-1,1)\}+2\tilde{\gamma}_{31}G_2(\tilde{t};m,1)$$
$$=2\tilde{t}\,G_2(\tilde{t};m,0)-\tilde{\gamma}_{12}\{G_2(\tilde{t};m+1,0)+G_2(\tilde{t};m-1,0)\}-2\delta_{m,0} \qquad (13)$$

と(13),(11)式から求められる。

これらの LGF が分ると2次元格子の場合には y 軸に平行な $n+1$ 番目の線上の、又、3次元格子の場合には x-y 面に平行な $n+1$ 番目の面上の、任意の RLP の LGF が、それぞれ、

$$\frac{\tilde{\gamma}_{23}}{2}\{G_2(\tilde{t};m+1,n+1)+G_2(\tilde{t};m-1,n+1)\}+\tilde{\gamma}_{31}G_2(\tilde{t};m,n+1)$$
$$=2\tilde{t}\,G_2(\tilde{t};m,n)-\tilde{\gamma}_{12}\{G_2(\tilde{t};m+1,n)+G_2(\tilde{t};m-1,n)\}$$
$$-\frac{\tilde{\gamma}_{23}}{2}\{G_2(\tilde{t};m+1,n-1)+G_2(\tilde{t};m-1,n-1)\}-\tilde{\gamma}_{31}G_2(\tilde{t};m,n-1) \qquad (14)$$

と(14),(11)式により順次得られる。即ち、2次元格子、3次元格子に対して任意の RLP での LGF が得られたことになる。

$\{\gamma_1\}, \{\gamma_{12}\}, \{\gamma_{123}\}$の選び方によりSO(1st n.n. int., 2nd n.n. int., 3rd n.n. int.), FCO(1st n.n. int.), BCO(1st n.n. int.), R(1st n.n. int., 2nd n.n. int.), CR(1st n.n. int.)に対するLattice Green's Functionsが任意のReference Lattice Pointで計算できる。電子計算機を用いて得られた結果は頁数の関係で別の文献で報告する。

[Appendix]

[I] $k > 1$

$$K(k) = \frac{1}{k}\left[K\left(\frac{1}{k}\right) + iK\left(\frac{\sqrt{k^2-1}}{k}\right)\right]$$

$$E(k) = k\left[E(k^{-1}) - (1-k^{-2})K(k^{-1})\right] + ik\left[E\left(\sqrt{1-k^{-2}}\right) - k^{-2}K\left(\sqrt{1-k^{-2}}\right)\right]$$

$$\Pi(\alpha^2, k) = k^{-1}\Pi(\alpha^2k^{-2}, k^{-1}) + ik^{-1}\left[K\left(\sqrt{1-k^{-2}}\right) + \frac{\alpha^2}{k^2-\alpha^2}\Pi\left(\frac{k^2-1}{k^2-\alpha^2}, \sqrt{1-k^{-2}}\right)\right]$$

[II] $k < -1$

[I]の$K(k)$, $E(k)$, $\Pi(\alpha^2, k)$の式でcomplex conjugateな式

[III] $k_I > 0$

$$K(ik_I) = (1+k_I^2)^{-1/2}K\left((1+k_I^2)^{-1/2}\right)$$

$$E(ik_I) = (1+k_I^2)^{1/2}E\left((1+k_I^2)^{-1/2}\right)$$

$$\Pi(\alpha^2, ik_I) = (1+k_I^2)^{-1/2}\left[\frac{k_I^2}{\alpha^2+k_I^2}K\left(\frac{k_I}{\sqrt{1+k_I^2}}\right) + \frac{\alpha^2}{\alpha^2+k_I^2}\Pi\left(\frac{\alpha^2+k_I^2}{1+k_I^2}, \frac{k_I}{\sqrt{1+k_I^2}}\right)\right]$$

[IV] $k_I < 0$

$$K(ik_I) = -\frac{1}{\sqrt{1+k_I^2}} K\left(\frac{-k_I}{\sqrt{1+k_I^2}}\right) + 2i \frac{1}{\sqrt{1+k_I^2}} K\left(\frac{1}{\sqrt{1+k_I^2}}\right)$$

$$E(ik_I) = 3\sqrt{1+k_I^2}\, E\left(\frac{-k_I}{\sqrt{1+k_I^2}}\right) - \frac{4}{\sqrt{1+k_I^2}} K\left(\frac{-k_I}{\sqrt{1+k_I^2}}\right)$$
$$+ 2i\left[\sqrt{1+k_I^2}\, E\left(\frac{1}{\sqrt{1+k_I^2}}\right) - \sqrt{1+k_I^2}\, K\left(\frac{1}{\sqrt{1+k_I^2}}\right)\right]$$

$$\Pi(\alpha^2, ik_I) = \frac{1}{\sqrt{1+k_I^2}}\left[\frac{k_I^2\alpha^2 + k_I^2 + 2\alpha^2}{(\alpha^2+k_I^2)(\alpha^2-1)} K\left(\frac{-k_I}{\sqrt{1+k_I^2}}\right) + \frac{2}{1-\alpha^2}\Pi\left(\frac{\alpha^2-1}{\alpha^2(1+k_I^2)}, \frac{-k_I}{\sqrt{1+k_I^2}}\right)\right]$$
$$+ 2i \frac{1}{\sqrt{1+k_I^2}}\left[K\left(\frac{1}{\sqrt{1+k_I^2}}\right) + \frac{\alpha^2}{1-\alpha^2}\Pi\left(\frac{1}{1-\alpha^2}, \frac{1}{\sqrt{1+k_I^2}}\right)\right]$$

[V] $k = k_R - i\epsilon, \quad \epsilon \geq 0 \quad |k_R| < 1$

$$K(k) = K(k_R) + 2iK\left(\sqrt{1-k_R}\right)$$

[文 献]

1) T. Horiguchi, Y. Yamazaki and T. Morita
Lattice Green's Function For The Orthorhombic Lattice In Terms Of The Complete Elliptic Integral, J. Math. Phys. (1971) to appear

2) Y. Yamazaki and T. Morita
Useful Procedure For Computing The Lattice Green's Function
— Rectangular and Orthorhombic Lattice —, in preparation

• 山崎, 堀口, 森田
Orthorhombic Lattice に対する Lattice Green's Function
京大数理解析研, 講究録 115 (1971.4)

3)

Lattice Green's Function For The Face Centered Orthorhombic Lattice In Terms Of The Complete Elliptic Integral – At The Origin – , in preparation

4)

Useful Procedure For Computing The Lattice Green's Function – Centered Rectangular And Face Centered Orthorhombic Lattice –, in preparation.

5)

Lattice Green's Function For The Orthorhombic Lattice With Up To The 2nd n.n. Interaction , in preparation

6)

Lattice Green's Function For The Orthorhombic Lattice With Up To The 2nd n.n. Interaction , in preparation